

week11: Beispiele: Anharmonische Oszillatoren in einer Dimension

Eine recht nützliche Sache bei den Hamiltonschen Gleichungen ist, dass sie als System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung sehr standard-mässig numerisch integriert¹ werden können. Das wollen wir uns hier am Beispiel von eindimensionalen anharmonischen Oszillatoren etwas genauer anschauen. Dabei werden wir feststellen, dass die Frequenzen oder die Schwingungsdauern dieser Oszillatoren, anders als beim harmonischen Oszillator, von der Anfangsauslenkung abhängen. Beim harmonischen Oszillator, nehmen wir etwa ein Feder-Schwere-Pendel mit Federkonstante D und Masse m , ist die Periodendauer $T = 2\pi\sqrt{m/D}$ unabhängig von der Anfangsauslenkung x_0 . Bei anharmonischen Oszillatoren ist das anders, die Schwingungsdauer T hängt von der Anfangsauslenkung x_0 ab. Schauen wir uns das jetzt an.

Wir betrachten eine eindimensionale Bewegung eines Teilchens mit Masse $m = 1$ in einem Potential

$$V(x) = \frac{\lambda}{\alpha} |x|^\alpha \quad (1)$$

mit $\alpha \geq 1$. Die Kraft, die von einem solchen Potential erzeugt wird, ist gegeben durch

$$F(x) = -V'(x) = -\lambda \operatorname{sign}(x) |x|^{\alpha-1} \quad (2)$$

mit der Vorzeichen-Funktion

$$\operatorname{sign}(x) := \begin{cases} +1 & \text{falls } x > 0 \\ -1 & \text{falls } x < 0 \end{cases} \quad (3)$$

Die Kraft ist also immer zum Koordinatenursprung hin gerichtet. Für die Fälle $\alpha \in \{1, 2, 4\}$, die uns hier am meisten interessieren, erhalten wir wegen $\operatorname{sign}(x)|x| = x$

$$F(x) = -\lambda \times \begin{cases} \operatorname{sign}(x) & \text{falls } \alpha = 1, \text{ linear oscillator} \\ x & \text{falls } \alpha = 2, \text{ harmonic oscillator} \\ x^3 & \text{falls } \alpha = 4, \text{ quartic oscillator} \end{cases}$$

Wir setzen die Masse auf $m = 1$ so dass die Hamilton-Funktion also gegeben ist durch

$$H = H(x, p) = \frac{p^2}{2} + \frac{\lambda}{\alpha} |x|^\alpha \quad (4)$$

¹der Begriff “integriert” meint hier typischerweise nicht das numerische Berechnen eines Integrals, sondern einfach nur das numerische Lösen des DGL-Systems, üblicherweise durch Iteration

Die Hamiltonschen Gleichungen lauten

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = p \quad (5)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\lambda \operatorname{sign}(x) |x|^{\alpha-1} \quad (6)$$

Wegen

$$\dot{x}_t = \frac{x_{t+dt} - x_t}{dt} \Rightarrow x_{t+dt} = x_t + \dot{x}_t dt$$

können wir dann auf einfache Weise eine numerische Lösung durch Iteration bekommen:

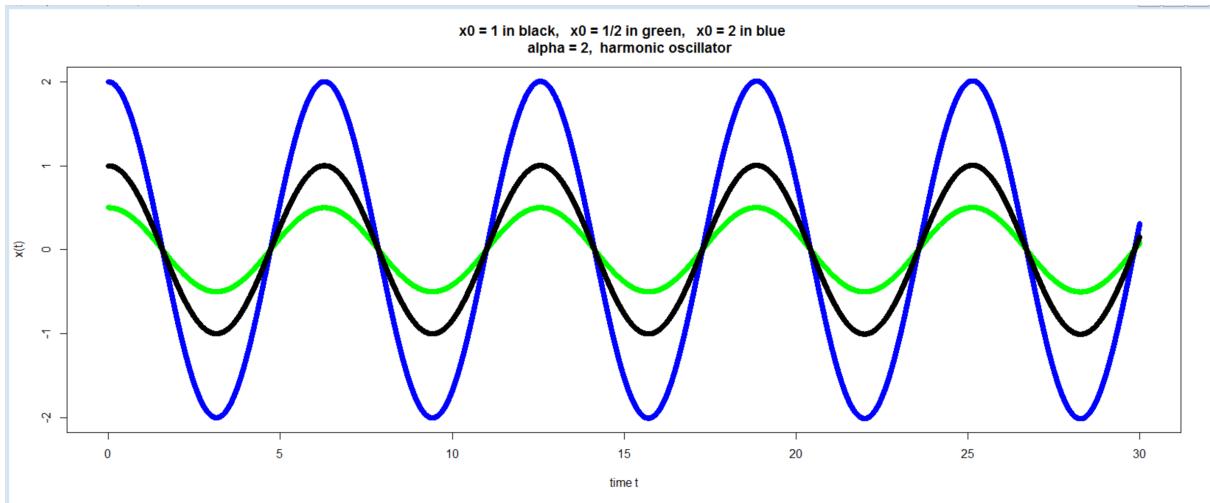
$$x_{t+dt} = x_t + p_t dt \quad (7)$$

$$p_{t+dt} = p_t - \lambda \operatorname{sign}(x_t) |x_t|^{\alpha-1} dt \quad (8)$$

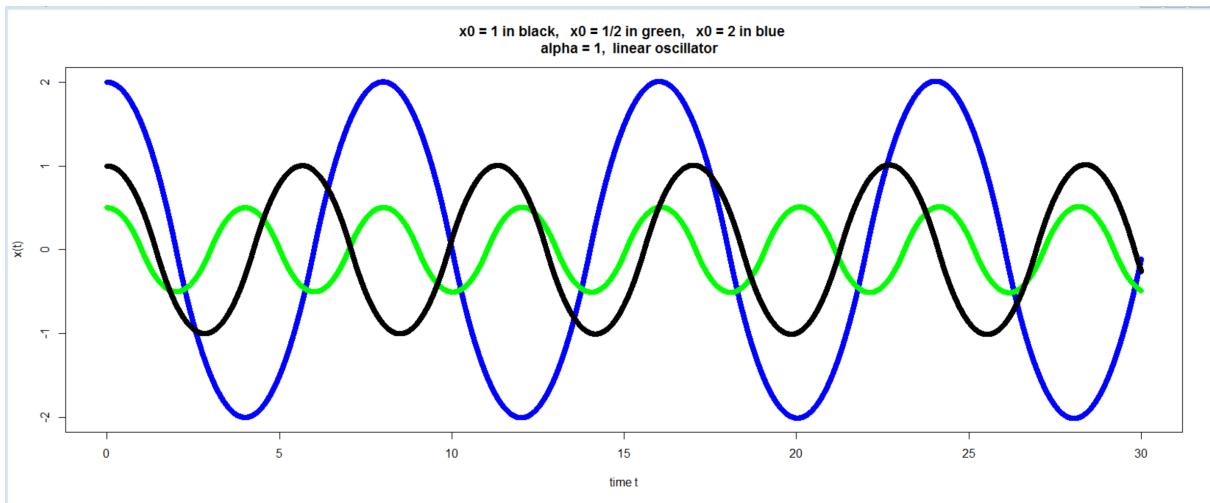
Wir wählen die Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} x_0 &\in \{0.5, 1, 2\} \\ p_0 &= 0 \end{aligned}$$

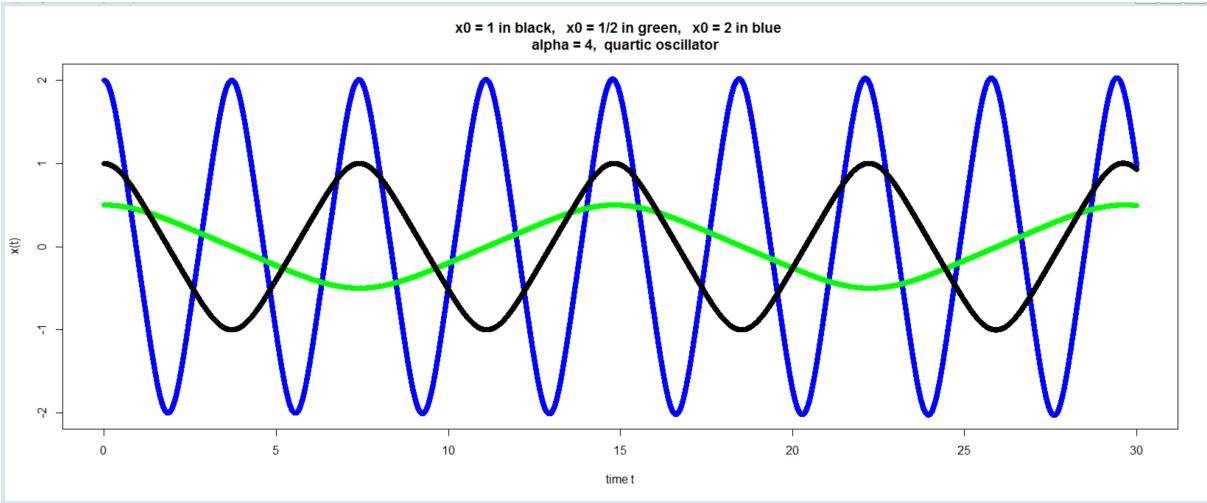
und simulieren die Bewegungsgleichungen für $\alpha \in \{1, 2, 4\}$:



harmonischer Oszillator für verschiedene Anfangsauslenkungen x_0 ,
die Schwingungsdauer T ist unabhängig von x_0



linearer Oszillator für verschiedene Anfangsauslenkungen x_0 ,
die Schwingungsdauer T wird grösser, wenn x_0 grösser wird



quartischer Oszillator für verschiedene Anfangsauslenkungen x_0 ,
die Schwingungsdauer T wird kleiner, wenn x_0 grösser wird

Berechnung der Periodendauer

Für die Lösungskurven (x_t, p_t) von (5) und (6) muss gelten $H(x_t, p_t) = E = \text{const}$ oder

$$\frac{p^2}{2} + \frac{\lambda}{\alpha} |x|^\alpha = E \quad (9)$$

Gleichung (9) können wir gewährleisten, indem wir folgende Parametrisierung wählen:

$$p_t = \sqrt{2E} \sin \varphi_t \quad (10)$$

$$x_t = (E \frac{\alpha}{\lambda} \cos^2 \varphi_t)^{\frac{1}{\alpha}} \quad (11)$$

Durch (10,11) wird zwar (9) gewährleistet, aber es kann nicht die gesamte Höhenlinie $H(x, p) = E$ durchlaufen werden, da das x_t immer positiv ist. Für den Fall $\alpha = 2$, lassen wir die Konstanten mal weg, steht da im wesentlichen $p = \sin \varphi$ und $x = \sqrt{\cos^2 \varphi} = |\cos \varphi|$, wir möchten da aber gerne ein $\cos \varphi$ ohne Betrag haben. Das können wir dadurch erreichen, indem wir mit dem Vorzeichen $\text{sign}(\cos \varphi)$ multiplizieren. Also schreiben wir anstatt (10,11)

$$p_t = -\sqrt{2E} \sin \varphi_t \quad (12)$$

$$x_t = \text{sign}(\cos \varphi_t) \times (E \frac{\alpha}{\lambda} \cos^2 \varphi_t)^{\frac{1}{\alpha}} \quad (13)$$

Wir haben in Gleichung (12) noch ein Minus eingebaut, weil $p_t = \dot{x}_t$ mit negativen Werten startet wenn $x_0 > 0$ ist was wir mal annehmen wollen. Wenn wir das dann so parametrisieren, ist das φ_t eine wachsende Funktion mit t , ansonsten würde das φ_t von $\varphi_0 = 0$ aus mit negativen Werten starten, kann man natürlich auch machen.

Aus der Hamiltonschen Gleichung (6), das war

$$\dot{p} = -\lambda \text{sign}(x) |x|^{\alpha-1} \quad (14)$$

erhalten wir dann die Dynamik für das φ_t ,

$$\begin{aligned} \dot{p}_t &= -\sqrt{2E} \dot{\varphi}_t \cos \varphi_t \stackrel{!}{=} -\lambda \text{sign}(x) |x|^{\alpha-1} \\ &= -\lambda \text{sign}(\cos \varphi_t) \times (E \frac{\alpha}{\lambda} \cos^2 \varphi_t)^{1-\frac{1}{\alpha}} \\ &= -\lambda^{\frac{1}{\alpha}} (E \alpha)^{1-\frac{1}{\alpha}} \times \text{sign}(\cos \varphi_t) \times \frac{\cos^2 \varphi_t}{|\cos \varphi_t|^{\frac{2}{\alpha}}} \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
\dot{\varphi}_t &= \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda^{\frac{1}{\alpha}} E^{\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha}} \alpha^{1 - \frac{1}{\alpha}} \times \text{sign}(\cos \varphi_t) \times \frac{\cos \varphi_t}{|\cos \varphi_t|^{\frac{2}{\alpha}}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda^{\frac{1}{\alpha}} E^{\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha}} \alpha^{1 - \frac{1}{\alpha}} \times \frac{|\cos \varphi_t|}{|\cos \varphi_t|^{\frac{2}{\alpha}}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda^{\frac{1}{\alpha}} E^{\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha}} \alpha^{1 - \frac{1}{\alpha}} \times |\cos \varphi_t|^{1 - \frac{2}{\alpha}} \\
&=: \kappa |\cos \varphi_t|^{1 - \frac{2}{\alpha}}
\end{aligned} \tag{15}$$

mit der Konstanten

$$\begin{aligned}
\kappa &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda^{\frac{1}{\alpha}} E^{\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha}} \alpha^{1 - \frac{1}{\alpha}} \\
&\stackrel{(17)}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda^{\frac{1}{\alpha}} \left(\frac{\lambda}{\alpha} x_0^\alpha \right)^{\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha}} \alpha^{1 - \frac{1}{\alpha}} \\
&= \left(\frac{\alpha \lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} x_0^{\frac{\alpha}{2} - 1}
\end{aligned} \tag{16}$$

Dabei haben wir die Gleichung

$$E = \frac{\lambda}{\alpha} x_0^\alpha \tag{17}$$

benutzt, die eine Konsequenz der Energieerhaltung ist, wenn wir mit $p_0 = \dot{x}_0 = 0$ bei $t = 0$ starten. Die Parametrisierung (13) können wir dann auch folgendermassen schreiben:

$$x_t = x_0 \times \text{sign}(\cos \varphi_t) |\cos \varphi_t|^{\frac{2}{\alpha}} \tag{18}$$

und der Startwert $\varphi_{t=0} = 0$ liefert dann genau die Anfangsbedingungen $x_{t=0} = x_0$ und $p_0 = 0$. Die Dynamik von x_t ist durch das φ_t gegeben, und φ_t ist durch Gleichung (15) gegeben,

$$\dot{\varphi}_t = \kappa |\cos \varphi_t|^{1 - \frac{2}{\alpha}}$$

Das können wir integrieren und bekommen

$$I(\varphi_t) := \int_0^{\varphi_t} \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1 - \frac{2}{\alpha}}} = \kappa t \tag{19}$$

Damit können wir sofort eine Formel für die Schwingungsdauer T angeben, dazu muss das φ_t genau eine volle Periode von 0 bis 2π durchlaufen. Also:

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1 - \frac{2}{\alpha}}} = \kappa T \tag{20}$$

oder

$$T = \frac{1}{\kappa} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1 - \frac{2}{\alpha}}} = \left(\frac{2}{\alpha \lambda} \right)^{\frac{1}{2}} x_0^{1 - \frac{\alpha}{2}} I(2\pi) \tag{21}$$

Für den harmonischen Oszillatator mit $\alpha = 2$ haben wir

$$I(2\pi) = \int_0^{2\pi} 1 d\varphi = 2\pi$$

und wir bekommen die übliche Formel

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{1}{\lambda}} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{D}} \tag{22}$$

mit Masse $m = 1$ und Federkonstanten $D = \lambda$. Für beliebiges α erhalten wir offensichtlich

$$T \sim \begin{cases} \sqrt{x_0} & \text{falls } \alpha = 1, \text{ linear oscillator} \\ \frac{1}{x_0} & \text{falls } \alpha = 4, \text{ quartic oscillator} \end{cases} \quad (23)$$

und genau dieses Verhalten kann man auch an den Bildern von oben beobachten.

Genauere Beschreibung der Dynamik

Die Dynamik ist gegeben durch Gleichung (18),

$$x_t = x_0 \times \text{sign}(\cos \varphi_t) |\cos \varphi_t|^{\frac{2}{\alpha}} \quad (24)$$

mit φ_t gegeben durch Gleichung (19),

$$I(\varphi_t) := \int_0^{\varphi_t} \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \stackrel{!}{=} \kappa t \quad (25)$$

Das $I(\varphi)$ ist eine streng monoton wachsende Funktion, sie hat also auf jeden Fall eine Umkehrfunktion I^{-1} und wir können schreiben

$$\varphi_t = I^{-1}(\kappa t) \quad (26)$$

$$\cos \varphi_t = \cos[I^{-1}(\kappa t)] \quad (27)$$

allerdings lässt sich, für beliebiges α , das $I^{-1}(s)$ nicht mehr durch elementare Funktionen ausdrücken. Es ist noch möglich, das folgende Theorem hinzuschreiben:

Theorem 3.1.4: Es sei $I : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben durch (25). Weiter sei $C : \mathbb{R} \rightarrow [-1, 1]$ gegeben durch

$$C(s) := \cos[I^{-1}(s)] \quad (28)$$

Dann gilt:

a) Das $C(s)$ ist eine $2c$ -periodische Funktion mit

$$c := \int_0^\pi \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \quad (29)$$

b) Für $s \in [0, 2c]$ gilt:

$$C(s) = \begin{cases} +C_0(s) & \text{falls } s \in [0, \frac{c}{2}] \\ -C_0(s-c) & \text{falls } s \in (\frac{c}{2}, \frac{3c}{2}] \\ +C_0(s-2c) & \text{falls } s \in (\frac{3c}{2}, 2c] \end{cases} \quad (30)$$

mit der positiven Funktion

$$\begin{aligned} C_0 &: \left[-\frac{c}{2}, \frac{c}{2} \right] \rightarrow [0, 1] \\ C_0(s) &:= \cos[I_0^{-1}(s)] \end{aligned} \quad (31)$$

und I_0 ist die Einschränkung von I auf das Intervall $[-\pi/2, \pi/2]$, das heisst, I_0 ist die bijektive Funktion

$$\begin{aligned} I_0 &: \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right] \rightarrow \left[-\frac{c}{2}, \frac{c}{2} \right] \\ I_0(\varphi) &:= \int_0^\varphi \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} . \end{aligned} \quad (32)$$

Es gilt $C_0(-\frac{c}{2}) = C_0(+\frac{c}{2}) = 0$.

c) Für $\alpha = 2$ ist $c = \pi$ und C_0 ist die positive Funktion

$$\begin{aligned} C_0 &: \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right] \rightarrow [0, 1] \\ C_0(s) &= \cos(s) \end{aligned} \quad (33)$$

d) Für $\alpha = 1$ ist $c = 2$ und C_0 ist die positive Funktion

$$\begin{aligned} C_0 &: [-1, 1] \rightarrow [0, 1] \\ C_0(s) &= \sqrt{1 - s^2} . \end{aligned} \quad (34)$$

e) Für beliebiges $\alpha \geq 1$ lässt sich die Lösung (24) für den anharmonischen Oszillatator mit Anfangsbedingungen $x_{t=0} = x_0$ und $p_0 = 0$ schreiben als

$$x_t = x_0 \times \text{sign}\{C(2ct/T)\} \times |C(2c \frac{t}{T})|^{\frac{2}{\alpha}} \quad (35)$$

mit den Funktionen C und C_0 aus dem Teil (b).

Beweis Theorem 3.1.4: Für beliebiges $\varphi \in \mathbb{R}$ gibt es immer ein eindeutiges $k \in \mathbb{Z}$ und $\tilde{\varphi} \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ mit

$$\varphi = k\pi + \tilde{\varphi}, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad \tilde{\varphi} \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$$

Wir können dann schreiben

$$\begin{aligned} I(\varphi) &= \int_0^\varphi \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \\ &= \int_0^{k\pi+\tilde{\varphi}} \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \\ &= \int_0^{k\pi} \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} + \int_{k\pi}^{k\pi+\tilde{\varphi}} \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \\ &= k \int_0^\pi \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} + \int_0^{\tilde{\varphi}} d\phi \frac{d\phi}{|\cos(\phi+k\pi)|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \\ &= k c + \int_0^{\tilde{\varphi}} \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \\ &= k c + I_0(\tilde{\varphi}) \end{aligned} \quad (36)$$

mit

$$c := \int_0^\pi \frac{d\phi}{|\cos \phi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \quad (37)$$

Um die Umkehrfunktion $\varphi = I^{-1}(s)$ zu finden, müssen wir die Gleichung

$$\begin{aligned} s &= I(\varphi) = k c + I_0(\tilde{\varphi}) = k c + I_0(\varphi - k\pi) \\ \Leftrightarrow s - k c &= I_0(\varphi - k\pi) \end{aligned} \quad (38)$$

nach φ auflösen. Für $\tilde{\varphi} = \varphi - k\pi \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ ist $I_0(\tilde{\varphi})$, also das Bild von I_0 , genau das Intervall $[-\frac{c}{2}, \frac{c}{2}]$. Also, um (38) lösen zu können, muss

$$\tilde{s} := s - k c \in [-\frac{c}{2}, \frac{c}{2}]$$

gelten. Und wir bekommen dann also

$$\varphi - k\pi = I_0^{-1}(\tilde{s}) = I_0^{-1}(s - k c)$$

oder

$$\varphi = I^{-1}(s) = k\pi + I_0^{-1}(\tilde{s}) = k\pi + I_0^{-1}(s - k c)$$

Wir erhalten dann

$$\begin{aligned} C(s) &:= \cos[I^{-1}(s)] = \cos[k\pi + I_0^{-1}(s - k c)] \\ &= (-1)^k \times \cos[I_0^{-1}(s - k c)] \\ &= (-1)^k \times C_0(s - kc) \end{aligned} \quad (39)$$

Dabei ist das $k \in \mathbb{Z}$ die eindeutig bestimmte ganze Zahl, so dass

$$\tilde{s} := s - k c \in \left(-\frac{c}{2}, \frac{c}{2}\right] \quad (40)$$

Ist

$$s_1 = k_1 c + \tilde{s}$$

mit $\tilde{s} \in \left(-\frac{c}{2}, \frac{c}{2}\right]$, dann ist

$$s_2 := s_1 + 2c = k_1 c + \tilde{s} + 2c = (k_1 + 2)c + \tilde{s}$$

und damit

$$C(s_2) = (-1)^{k_2} \times C_0(\tilde{s}) = (-1)^{k_1+2} \times C_0(\tilde{s}) = (-1)^{k_1} \times C_0(\tilde{s}) = C(s_1)$$

also ist $C(s)$ eine $2c$ -periodische Funktion. Mit den Gleichungen (39) und (40) erhalten wir weiterhin

$$C(s) = \begin{cases} + C_0(s) & \text{falls } s \in [0, \frac{c}{2}] \\ - C_0(s - c) & \text{falls } s \in (\frac{c}{2}, \frac{3c}{2}] \\ + C_0(s - 2c) & \text{falls } s \in (\frac{3c}{2}, 2c] \end{cases} \quad (41)$$

Damit sind Teil (a) und (b) bewiesen.

Teil (c) und (d): Wir bekommen die folgenden c 's: Für $\alpha = 2$,

$$c = \int_0^\pi \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1-\frac{2}{2}}} = \int_0^\pi d\varphi = \pi$$

und für $\alpha = 1$,

$$\begin{aligned} c &= \int_0^\pi \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1-\frac{2}{1}}} = \int_0^\pi d\varphi |\cos \varphi| \\ &= \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos \varphi + \int_{\pi/2}^\pi d\varphi (-\cos \varphi) = 1 - (-1) = 2 \end{aligned}$$

Die Funktion C_0 ist definiert durch

$$C_0(s) := \cos[I_0^{-1}(s)]$$

wir müssen also jeweils das I_0^{-1} bestimmen. Für $\alpha = 2$ haben wir

$$I_0(\varphi) = \int_0^\varphi \frac{d\phi}{(\cos \phi)^{1-\frac{2}{2}}} = \int_0^\varphi d\phi = \varphi$$

und wir bekommen

$$I_0^{-1}(s) = s$$

und damit

$$C_0(s) = \cos[I_0^{-1}(s)] = \cos(s) .$$

Für $\alpha = 1$ ist

$$\begin{aligned} I_0(\varphi) &= \int_0^\varphi \frac{d\phi}{(\cos \phi)^{1-\frac{2}{1}}} = \int_0^\varphi d\phi |\cos \phi| \\ &\stackrel{\varphi \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]}{=} \int_0^\varphi d\phi \cos \phi = \sin \varphi \end{aligned}$$

und wir bekommen

$$I_0^{-1}(s) = \arcsin(s)$$

Wegen $\arcsin(s) \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ und da $\cos \varphi$ auf $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ eine positive Funktion ist, erhalten wir dann

$$\begin{aligned} C_0(s) &= \cos[I_0^{-1}(s)] = \cos[\arcsin(s)] \\ &= + \sqrt{1 - \sin^2[\arcsin(s)]} \\ &= + \sqrt{1 - s^2} . \end{aligned}$$

Teil (e): Wir erinnern wir uns an die Formel (20) für die Schwingungsdauer T und können dann schreiben

$$\kappa T = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{|\cos \varphi|^{1-\frac{2}{\alpha}}} \stackrel{(29)}{=} 2c \quad (42)$$

Die Gleichung (27) liefert dann

$$\cos \varphi_t = \cos[I^{-1}(\kappa t)] \stackrel{(28)}{=} C(\kappa t) \stackrel{(42)}{=} C(2c \frac{t}{T}) \quad (43)$$

Damit erhalten wir schliesslich die Lösung

$$\begin{aligned} x_t &= x_0 \times \text{sign}(\cos \varphi_t) |\cos \varphi_t|^{\frac{2}{\alpha}} \\ &= x_0 \times \text{sign}\{C(2ct/T)\} \times |C(2c \frac{t}{T})|^{\frac{2}{\alpha}} \end{aligned} \quad (44)$$

und das Theorem ist bewiesen. ■

Für den harmonischen Oszillatator mit $\alpha = 2$ liefert das Theorem die übliche Lösung

$$x_t = x_0 \cos\left(\frac{2\pi}{T} t\right) \quad (45)$$

und für den linearen Oszillatator mit $\alpha = 1$ bekommen wir dann mit dem Teil (d) des Theorems

$$x_t = x_0 \times \text{sign}\{C(4t/T)\} \times |C(4 \frac{t}{T})|^2 \quad (46)$$

mit $C_0(s)^2 = 1 - s^2$. Dass wir hier eine quadratische Abhängigkeit von der Zeit haben, ist nicht weiter erstaunlich, weil die Kraft ja konstant ist, wie die Schwerkraft, solange sich das Teilchen auf einer Seite vom Ursprung befindet. Dementsprechend ist die Bewegung wie der freie Fall, nur immer zum Koordinatenursprung hin gerichtet.